

- красно-черное дерево можно использовать для того чтобы найти в нем слово (или группу слов) только по первым его буквам, а для хеш-таблиц поиск возможен только по точному совпадению;
- красно-черное дерево строится быстрее хэш-таблицы в среднем в 1.5 раза быстрее, например, при подаче на вход произведения «Война и мир», красно-черное дерево было составлено за 856 мс. против 1157 мс. у хеш-таблицы.
- хеш-таблицы реализованы в закрытой библиотеке, а разработанная структура данных открыта [5] и может применяться в учебных целях.

Недостатки метода:

- поиск слова в хеш-таблице производится за константное время, а в красно-черном дереве асимптотическая средняя граница данной операции является логарифмической $O(\ln n)$;
- если при операции поиска искомое значение отсутствует в красно-черном дереве, то время ее выполнения может увеличиться в 2 раза.

Сравнение рассмотренных структур приводит к заключению: для организации более гибкого поиска в словаре предпочтительнее бинарное дерево.

1. Багель А. Delphi, Синтаксис, Текст и Строки: Словарь уникальных слов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.kansoftware.ru/archives/dict.zip> (дата обращения: 21.02.2015).
2. Кормен Т.Х., Лейзерсон Ч.И., Ривест Р.Л., Штайн К., Алгоритмы: построение и анализ, Вильямс (2005).
3. Опрышко А. В., Сравнение АВЛ и Красно-черного дерева, Молодежный научно – технический вестник (2014).
4. Акопов Р. Двоичные деревья поиска, RSDN Magazine (2003).
5. Пепелев А.М., Исходный код программы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://tinyurl.com/l8qzvyd>.

Z-МЕТОД РАСЧЕТА КРИВЫХ ПЛАВЛЕНИЯ В КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКЕ

Правишкина Т.А.^{1*}, Караваев А.В.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ ФГУП «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Россия

*E-mail: T.A.Pravishkina@urfu.ru

Z-METHOD FOR MELTING CURVE CALCULATIONS IN CLASSICAL MOLECULAR DYNAMICS

Pravishkina T.A.^{1*}, Karavaev A.V.²

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin Institute of Technical Physics (RFNC - VNIITF), Snezhinsk, Russia

The work is devoted to an investigation of recently developed modification [1] of so called Z-method [2,3] for melting curve calculations. In the method microcanonical ensemble calculations are performed for virtual samples in rectangular elongated in one of the directions simulation box. The use of such geometry provides for the ability to obtain steady solid-liquid coexistence state. The melting line parameters (temperatures and pressures) are estimated for the coexistence states.

Методы Классической Молекулярной Динамики (КМД) и Монте Карло успешно развивались и применялись для моделирования различных свойств материалов, однако точное теоретическое предсказание поведения материалов при плавлении до сих пор является сложной задачей. Отчасти сложности, связанные с количественным описанием фазового поведения материалов связаны с качеством межатомных потенциалов, используемых в расчетах. Развитие современных полуэмпирических многочастичных межатомных потенциалов, при параметризации которых широко используются результаты первопринципных расчетов, делает описание различных свойств материалов, включая фазовые переходы, все более приближенным к реальности. Однако, несмотря на развитие моделей межатомного взаимодействия, определение температуры плавления даже в рамках заданной модели может быть весьма нетривиальной задачей в силу того, что фазовым переходам первого рода свойственен значительный гистерезис, причем данный гистерезис может быть тем больше, чем меньше число частиц в моделируемой системе. Для относительно небольших размеров моделируемых систем величина перегрева при плавлении может достигать десятков процентов (нескольких сотен градусов) по сравнению с термодинамически равновесной кривой плавления.

Существует несколько подходов для расчета кривых плавления в рамках КМД: метод простого постепенного нагревания кристаллического образца вплоть до плавления; метод сосуществования жидкой и твердой фаз; метод расчета свободной энергии и т.д. У всех приведенных методов есть свои достоинства и недостатки. Так, например, в первом, самом простом с точки зрения вычислений, методе в наибольшей мере проявляется гистерезис, упоминавшийся выше. Второй метод обладает большей точностью, но построение образцов для него требует значительного искусства. Последний метод расчета свободной энергии позволяет рассчитывать термодинамически равновесные кривые фазовых переходов первого рода, однако он требует значительно большего объема вычислений по сравнению с предыдущими методами.

Настоящая работа посвящена исследованию возможностей недавно предложенной модификации [1], так называемого, Z-метода [2,3] для оценки температуры плавления в рамках КМД. В рамках метода проводится моделирование поведения микроканонического ансамбля с различной энергией. В методе предлагается использовать систему в виде прямоугольного сильно вытянутого в одном из направлений параллелепипеда в периодических граничных условиях. Использование такой геометрии моделируемого образца позволяет получить устойчивое сосуществование жидкости и кристалла. Параметры линии плавления (температура и давление) оцениваются для состояния с сосуществующими фазами. Метод продемонстрировал высокую точность для весьма малого числа частиц (порядка нескольких сотен) в моделируемой системе.

1. Wang S. et al., J. Chem. Phys. 138, 134101 (2013).
2. Belonoshko A. et al., Phys. Rev. B 73, 012201 (2006).
3. Belonoshko A. et al., Phys. Rev. Lett. 100, 135701 (2008).

ВЫЯСНЕНИЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНИМОСТИ МОДЕЛИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ДИОКСИДЕ УРАНА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Коваленко М.А.^{1*}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: akm_max@mail.ru

CLARIFICATION OF THE APPLICABILITY RANGE OF THE POINT DEFECTS MODEL IN URANIUM DIOXIDE BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Kovalenko M.A.^{1*}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The point defects model with the formation of complexes of one cation vacancy and N anion vacancies was considered for uranium dioxide. Formation energies of complexes with $N=0\div 2$ (5.3÷5.8)eV are close to each other. MD simulations were carried out to derive complexes concentrations in a wide range of temperatures. Point defects model was modified for periodic boundary conditions. A comparison with MD results shows that the model is valid only at low temperatures below 1300K.

Теоретические модели, основанные на относительно простых приближениях, такие как термодинамическая модель точечных дефектов (МТД), используются как для обработки экспериментальных данных, так и для прогнозирования свойств объектов при длительных временах эксплуатации или в критических условиях. В случае диоксида урана (и его структурных аналогов) основными